**Uzbek Journal of Physics**
**DOI: https//doi.org/10.52304/.v25i3.447** 

# Дефекты, характерные для гидрогенизированных аморфных полупроводников, и спектры дефектного поглощения

**Б.Т. Абдулазизов[*,1], Р.Г. Икрамов[2], М.А. Нуриддинова[2], Б.К. Султанов[2], О.Т. Холмирзаев[2]**

[1]Наманганский государственный университет, ул. Уйчинская 316, 716019, Наманган, Узбекистан
[2]Наманганский инженерно-технологический институт, ул. Касансай 7, 160115, Наманган, Узбекистан

Получена 03.03.2023, revised 21.09.2023

* Corresponding author: e-mail: bt_abdulazizov@mail.ru, Phone +998 91 186 06 05

В настоящей работе теоретически исследованы спектры поглощения дефектов, характерных для гидрогенизированного аморфного кремния. Установлено, что основную роль в определении спектра дефектного поглощения играют парциальные спектры, определяемые оптическими переходами электронов между разрешенными зонами и дефектами. Показано, что при степенном распределении плотности электронных состояний в разрешенных зонах, спектры оптических переходов между ними и дефектами не зависят от значения этой степени.

**Ключевые слова:** аморфные полупроводники, оптические переходы электронов с участием дефектов, спектры дефектного поглощения, парциальные спектры оптических электронных переходов с участием дефектов.

In the present work, the absorption spectra of all defects characteristic of hydrogenated amorphous silicon are theoretically studied. It has been found that the main role in determining the defect absorption spectrum plays the partial spectra determined by optical transitions of electrons between allowed bands and defects. It is shown that with a power-law distribution of the density of electronic states in allowed bands, the spectra of optical transitions between them and defects do not depend on the value of this power.

**Keywords:** amorphous semiconductors, optical transitions of electrons with the participation of defects, spectra of defective absorption, partial spectra of optical electronic transitions with the participation of defects.

## I. Введение

Известно, что дефектные состояния, образованные оборванными связями, находящимися в щели подвижности гидрогенизированного аморфного кремния (α-Si:H), в зависимости от их зарядового состояния, разделяются на три типа. $D^0$ – нейтральный дефект, имеющий один электрон и одну дырку, $D^-$ – дефект с отрицательным зарядом, имеющий два электрона, и $D^+$ – дефект с положительным зарядом, имеющий две дырки. Все эти дефекты являются ловушками для электронов.

В работе [1] показано, что, вне зависимости от зарядового состояния дефектов, они участвуют во всех оптических переходах электронов.

В [2, 3] для энергетических положений и концентраций этих дефектов $D^+$, $D^0$ и $D^-$ в собственном α-Si:H, полученном в тлеющем газовом разряде, приведены следующие результаты: $\varepsilon_{D^0} - \varepsilon_V \approx 0.78$ эВ, $\varepsilon_{D^-} - \varepsilon_V \approx 0.5$ эВ, $\varepsilon_{D^+} - \varepsilon_V \approx 1.28$ эВ, $N_{D^0} \approx 4.5\times10$ см$^{-3}$, $N_{D^-} \approx 3\times10^{15}$ см$^{-3}$, $N_{D^+} \approx 3\times10^{15}$ см$^{-3}$.

Известно, что при поглощении фотонов с энергией $\hbar\omega<1.4$ эВ происходят электронные переходы с участием дефектных состояний и валентной зоны и её хвоста, а также с зоной проводимости и её хвостом. В зависимости от энергии поглощенных фотонов эти оптические переходы электронов представлены на рис. 1.

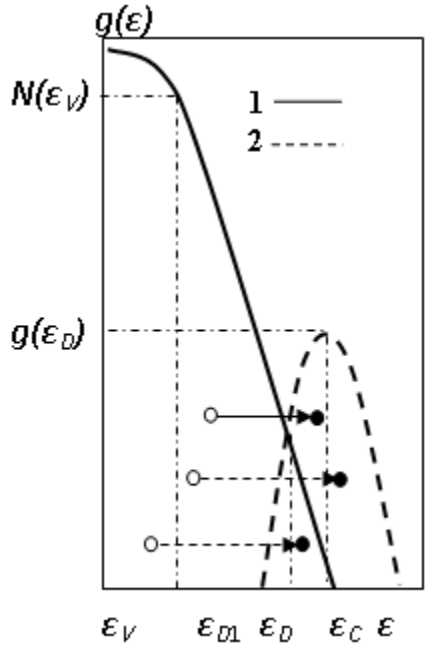



**Рисунок 1a.** Типичные электронные переходы с участием дефектных состояний, происходящие в аморфных полупроводниках при энергии поглощен-ных фотонов: 1 – $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V>\hbar\omega$ и 2 – $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$; g($\varepsilon_D$) – плотность электронных состояний. Светлые кружки – дырки, черные – электроны.

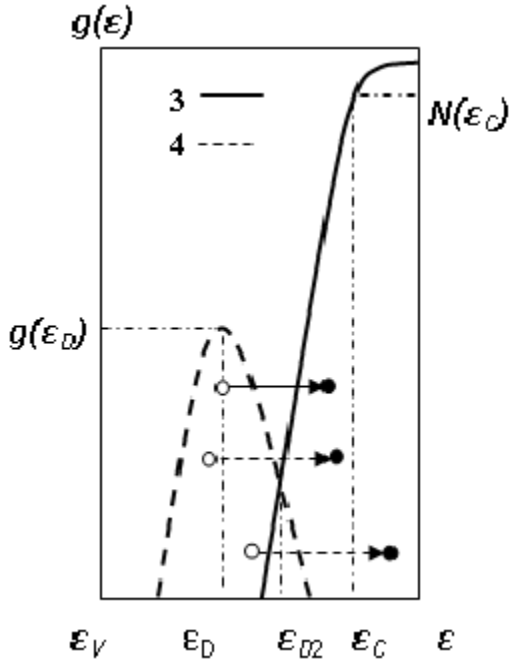



**Рисунок 1b.** Типы оптических электронных переходов с участием дефектных состояний, происходящих в аморфных полупроводниках при энергии поглощенных фотонов. 3 – $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}>\hbar\omega$ и 4 – $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}<\hbar\omega$.

При выполнении условия 1 – $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V>\hbar\omega$ для энергии поглощенных фотонов электроны, участвующие в оптическом переходе, переходят только от хвоста валентной зоны на дефект, а при выполнении условия 2 – $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$ электроны, переходят от валентной зоны и от её хвоста на дефект. Здесь $\varepsilon_{D1}$ — энергетическое положение точки пересечения распределения электронных состояний в хвосте валентной зоны и дефектов (рис. 1а), $\varepsilon_V$ – верхняя граница валентной зоны.

При выполнении условия 3 – $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}>\hbar\omega$ электроны переходят только от дефектов в хвост зоны проводимости, а при выполнении условия 4 – $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}<\hbar\omega$ оптические переходы электронов происходят одновременно от дефектных состоя-ний в хвост зоны проводимости, а также в зону проводимости. Здесь $\varepsilon_{D2}$ – энергетическое поло-жение точки пересечения распределения электронных состояний хвоста зоны проводи-мости и дефектных состояний (рис. 1б), $\varepsilon_C$ – нижняя граница зоны проводимости.

Беспорядок в структуре решетки аморфных полупроводников приводит к тому, что волновой вектор электронов, участвующих в оптических переходах, являются непериодичным квантовым числом.

## II. Метод исследования и результаты

Спектры всех типов оптических переходов электронов в аморфных полупроводниках рассчитывали по формуле Кубо-Гринвуда в приближении Дэвиса-Мотта [4]:

$$\alpha(\hbar\omega) = A\int \frac{g(\varepsilon)\,g(\varepsilon+\hbar\omega)}{\hbar\omega} d\varepsilon\,. \qquad (1)$$

В этой формуле $A$ – коэффициент пропорциональности, не зависящий от энергии поглощенных фотонов, $g(\varepsilon)$ – плотность начальных и $g(\varepsilon+\hbar\omega)$ – конечных состояний электронов, участвующих в оптических переходах.

В [5] показано, что интеграл в формуле (1) следует записывать в виде определенного интеграла для определения собственных решений спектров коэффициента поглощения.

Из этой формулы видно, что для определения аналитических решений парциальных спектров

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

дефектного поглощения необходимо знать распределение электронных состояний в разрешенных зонах и их хвостах, а также на дефектах. Для этого обычно используют разные модели [6, 7]. Почти во всех этих моделях распределение электронных состояний в разрешенных зонах является параболическим, а распределение электронных состояний в хвостах разрешенных зон является экспоненциальным. С учетом этого в [8] предложена модель распределения плотности электронных состояний в разрешенных зонах и их хвостах в следующем виде:

$$g(\varepsilon)=N(\varepsilon_V)\left(\frac{\varepsilon_C-\varepsilon}{E_g}\right)^{n_1},\quad n_1=0,\,1/2,\,1 \qquad (2)$$
$$g(\varepsilon)=N(\varepsilon_V)\exp\left(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V)\right)$$

$$g(\varepsilon)=N(\varepsilon_C)\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_V}{E_g}\right)^{n_2},\quad n_2=0,\,1/2,\,1 \qquad (3)$$
$$g(\varepsilon)=N(\varepsilon_C)\exp\left(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C)\right)$$

Здесь $N(\varepsilon_V)$ и $N(\varepsilon_C)$ – эффективные значения плотности электронных состояний в валентной зоне и в зоне проводимости; $E_g$ – энергетическая ширина щели подвижности; $\beta_1$ $\beta_2$ – параметры, определяющие кривизну экспоненциальных хвостов валентной зоны и зоны проводимости; $n_1$ и $n_2$ – степени функции распределения плотности электронных состояний в валентной зоне и зоне проводимости.

Как показано в работе [9], распределение дефектных состояний в аморфных полупроводниках подчиняется распределению гиперболического секанса:

$$g(\varepsilon)=\frac{g(\varepsilon_D)}{\mathrm{ch}\left(b(\varepsilon-\varepsilon_D)\right)}=\frac{2g(\varepsilon_D)}{\exp\left(b(\varepsilon-\varepsilon_D)\right)+\exp\left(-b(\varepsilon-\varepsilon_D)\right)} \qquad (4)$$

или распределению Гаусса:

$$g(\varepsilon)=g(\varepsilon_D)\exp\left(-a(\varepsilon-\varepsilon_D)^2\right), \qquad (5)$$

где $b$ и $a$ – параметры, определяющие эффективную полуширину распределения плотности электронных состояний на дефектах, $\varepsilon_D$ – энергетическое положение максимума дефектных состояний, $g(\varepsilon_D)$ – максимальное значение распределения плотности электронных состояний на дефектах.

В этой же работе показано, что концентрации дефектов, определяемые формулами (4) и (5), будут равными между собой, когда выполняется условие $a=b^2/\pi$.

Запишем интеграл в формуле Кубо-Гринвуда в виде определенного интеграла для условия $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V>\hbar\omega$ следующим образом:

$$\alpha=A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D1}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}. \qquad (6)$$

Подставляя плотности состояний (2), (3) и (4) в формулу (6), получаем следующее выражение:

$$\alpha=A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D1}} N(\varepsilon_V)\exp\left(-\beta_1(\varepsilon-\varepsilon_V)\right)\frac{g(\varepsilon_D)}{\mathrm{ch}\left(b(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega)\right)}\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=\frac{Bg(\varepsilon_D)}{bN(\varepsilon_C)}\times\exp(b(\varepsilon_V-\varepsilon_D+\hbar\omega))\times$$
$$\times\left(2b\hbar\omega+\ln\frac{(\exp(2b(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_D))+1)}{(\exp(2b(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_D+\hbar\omega))+1)}\right), \qquad (7)$$

где $B=AN(\varepsilon_V)N(\varepsilon_C)$. Для получения аналитического вида формулы (7) требуется выполнение условия $\beta_1=b$. Формулу (6) адаптируем к оптическим переходам электронов, при выполнении условия $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$:

$$\alpha=A\int_{\varepsilon_{D1-\hbar\omega}}^{\varepsilon_{D1}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=A\int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_{D1}} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}+A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} g(\varepsilon)g(\varepsilon+\hbar\omega)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega}=\alpha_1+\alpha_2, \qquad (8)$$

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

где $\alpha_1$ – парциальный спектр электронных переходов от хвоста валентной зоны на дефект, $\alpha_2$ – парциальный спектр оптических переходов из валентной зоны на дефект. Для оптических переходов электронов из хвоста валентной зоны на дефекты получаем выражение

$$\alpha_1 = A\int_{\varepsilon_V}^{\varepsilon_{D1}} N(\varepsilon_V)\exp\left(-\beta_1\left(\varepsilon-\varepsilon_V\right)\right)\frac{g\left(\varepsilon_D\right)}{\mathrm{ch}\left(b\left(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega\right)\right)}\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{Bg(\varepsilon_D)}{bN(\varepsilon_C)\hbar\omega}\exp(b(\varepsilon_V-\varepsilon_D+\hbar\omega))\times$$
$$\times(2b(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V))+\ln\frac{(\exp(2b(\varepsilon_V-\varepsilon_D+\hbar\omega))+1)}{(\exp(2b(\varepsilon_{D1}+\varepsilon_D+\hbar\omega))+1)}). \quad (9)$$

Для получения формулы (9) также требовалось выполнение условия $\beta_1 = b$. Рассчитаем парциальные спектры оптических переходов электронов из валентной зоны на дефекты. Для случая, когда $n_1$=0, мы получаем выражение.

$$\alpha_2 = A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} N(\varepsilon_V)\frac{g\left(\varepsilon_D\right)}{\mathrm{ch}\left(b\left(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega\right)\right)}\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{2Bg(\varepsilon_D)}{bN(\varepsilon_C)\hbar\omega}\times(arctg\exp(b(\varepsilon_V-\varepsilon_D+\hbar\omega))-$$
$$-\mathrm{arctg}\exp(b(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_D))) \quad (10)$$

В случае, если $n_1$=1, имеем:

$$\alpha_2 = A\int_{\varepsilon_{D1}-\hbar\omega}^{\varepsilon_V} N(\varepsilon_V)\left(\frac{\varepsilon_C-\varepsilon}{E_g}\right)\frac{g\left(\varepsilon_D\right)}{\mathrm{ch}\left(b\left(\varepsilon-\varepsilon_D+\hbar\omega\right)\right)}\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{2Bg(\varepsilon_D)}{bN(\varepsilon_C)E_g\hbar\omega}(\varepsilon_C-\varepsilon_D+\hbar\omega)\times(\mathrm{arctg}\exp(b(\varepsilon_V-\varepsilon_D+\hbar\omega))-$$
$$-\mathrm{arctg}\exp(b(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_D)))-\frac{Bg(\varepsilon_D)}{2aN(\varepsilon_C)E_g\hbar\omega}(\exp(-a(\varepsilon_V-\varepsilon_D+\hbar\omega)^2-\exp(-a(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_D)^2) \quad (11)$$

Величина $b$ в выражениях (10) и (11) может принимать произвольные значения. Аналитическое решение для случая, когда $n_1$=1/2, получить не удалось, поэтому оно вычислялось с использованием приближенных методов расчета.

Когда $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}>\hbar\omega$, для расчета спектров оптических переходов электронов от дефекта в хвост зоны проводимости запишем формулу Кубо-Гринвуда следующим образом:

$$\alpha = A\int_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} g\left(\varepsilon\right)g\left(\varepsilon+\hbar\omega\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} \quad (12)$$

Подставив функции распределения, заданные формулами (2)-(4), в формулу (12), получим:

$$\alpha = A\int_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} \frac{g\left(\varepsilon_D\right)}{\mathrm{ch}\left(b\left(\varepsilon-\varepsilon_D\right)\right)}N(\varepsilon_C)\exp\left(\beta_2\left(\varepsilon-\varepsilon_C+\hbar\omega\right)\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{Bg(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_V)b\hbar\omega}\exp(b(\varepsilon_D-\varepsilon_C+\hbar\omega))\ln\frac{1+\exp(2b(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D))}{1+\exp(2b(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D-\hbar\omega))}. \quad (13)$$

Расчет формулы (13) проведен для случая $\beta_1 = b$. Расчет формул (7), (13) проведен при выполнении условий $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$ и $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}<\hbar\omega$.

Применим формулу (12) к оптическим переходам электронов при условии $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}<\hbar\omega$:

$$\alpha = A\int_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} g\left(\varepsilon\right)g\left(\varepsilon+\hbar\omega\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = A\int_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} g\left(\varepsilon\right)g\left(\varepsilon+\hbar\omega\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} + A\int_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} g\left(\varepsilon\right)g\left(\varepsilon+\hbar\omega\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} =$$
$$=\alpha_1+\alpha_2. \quad (14)$$

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

где $\alpha_1$ – парциальные спектры оптических переходов электронов от дефектных состояний в зону проводимости, а $\alpha_2$ – от дефекта в хвост зоны проводимости.

Подставим функции распределения (2)-(5) в формулу (14) и рассчитаем парциальные спектры для переходов электрона от дефекта в зону проводимости, когда $n_2$=0:

$$\alpha_1 = A\int_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} \frac{g(\varepsilon_D)}{\mathrm{ch}\left(b(\varepsilon-\varepsilon_D)\right)} N(\varepsilon_C)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{2Bg(\varepsilon_D)}{b\hbar\omega N(\varepsilon_V)}(\mathrm{arctg}(\exp(b(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D)) - \mathrm{arctg}(\exp(b(\varepsilon_C-\varepsilon_D-\hbar\omega))) . \quad (15)$$

В случае $n_2$=1 получаем выражение:

$$\alpha_1 = A\int_{\varepsilon_C-\hbar\omega}^{\varepsilon_{D2}} \frac{g(\varepsilon_D)}{\mathrm{ch}\left(b(\varepsilon-\varepsilon_D)\right)} N(\varepsilon_C)\left(\frac{\varepsilon-\varepsilon_V+\hbar\omega}{E_g}\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} = \frac{2Bg(\varepsilon_D)}{b\hbar\omega E_g N(\varepsilon_V)}(\mathrm{arctg}(\exp(b(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D)) -$$
$$-\mathrm{arctg}(\exp(b(\varepsilon_C-\varepsilon_D-\hbar\omega))) - \frac{Bg(\varepsilon_D)}{2a\hbar\omega E_g N(\varepsilon_V)}(\exp(-a(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D)^2) - \exp(-a(\varepsilon_C-\varepsilon_D-\hbar\omega)^2)) \quad . \quad (16)$$

В формулах (15) и (16) значения $b$ могут быть произвольными.

При $n_2$=1/2 получить аналитическое решение не удалось, поэтому его вычисляли с использованием приближенных методов расчета. Теперь рассчитаем парциальный спектр оптических переходов электронов от дефекта в хвост зон проводимости:

$$\alpha_2 = A\int_{\varepsilon_{D2}-\hbar\omega}^{\varepsilon_C-\hbar\omega} \frac{g(\varepsilon_D)}{\mathrm{ch}\left(b(\varepsilon-\varepsilon_D)\right)} N(\varepsilon_C)\exp\left(\beta_2(\varepsilon-\varepsilon_C+\hbar\omega)\right)\frac{d\varepsilon}{\hbar\omega} =$$
$$= \frac{Bg(\varepsilon_D)}{b\hbar\omega N(\varepsilon_C)} \times \exp(b(\varepsilon_D-\varepsilon_C+\hbar\omega))\mathrm{Ln}\frac{1+\exp(2b(\varepsilon_C-\varepsilon_D-\hbar\omega))}{1+\exp(2b(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D-\hbar\omega))} \quad , \beta_2 = b. \quad (17)$$

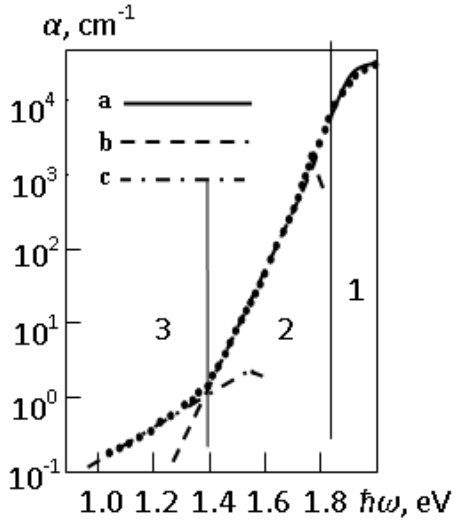



**Рисунок 2.** Экспериментально определенный спектр оптического поглощения аморфного гидрогенизированного кремния. 1 – область межзонного поглощения, 2 – область экспоненциального поглощения, 3 – область дефектного поглощения.

В [10] представлен спектр коэффициента поглощения, определенный из эксперимента для аморфного гидрогенизированного кремния, выращенного в высокочастотном тлеющем газовом разряде (рис. 2).

Для расчета значений приведенных выше парциальных спектров необходимо определить параметры $B$, $E_g$, $\beta_1$, $\beta_2$, $\varepsilon_{D1}$, $\varepsilon_{D2}$, $g(\varepsilon_D)$ и $b$; для этого воспользуемся экспериментально определенными значениями оптического поглощения спектра коэффициента поглощение.

Разделим этот спектр на области межзонного, экспоненциального и дефектного поглощения. Рассматривая $B$ и $E_g$ в аналитической формуле как параметры подгонки, определим путем сопоставления значений спектров межзонного поглощения, полученных из эксперимента, и рассчитаного аналитического выражения межзонного поглощения (18); точно таким образом определяем $\beta_1$ и $\beta_2$ из области экспоненциального поглощения.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

В работе [11] получено аналитическое выражение для спектра межзонного поглощения:

$$\alpha(\hbar\omega)=\frac{B}{4\hbar\omega E_g}\left[\begin{array}{l}2(\hbar\omega-E_g)\sqrt{E_g\hbar\omega}-\\-(E_g-\hbar\omega)^2\,\mathrm{arctg}\left(\dfrac{E_g-\hbar\omega}{2\sqrt{E_g\hbar\omega}}\right)\end{array}\right]. \quad (18)$$

Было установлено, что, когда $B$=1.71×10$^5$ см$^{-1}$ и $E_g$=1.8 эВ, экспериментально определенные значения соответствуют расчетным результатам, полученным по формуле (18) для спектра межзонного поглощения (рис. 2, кривая a).

В работе [8] показано, что значения $B$ и $E_g$ имеют одинаковое значение во всех областях коэффициента оптического поглощения, а для аналитического решения экспоненциального поглощения получено выражение:

$$\alpha(\hbar\omega)=\frac{B}{(\beta_2-\beta_1)\hbar\omega}\exp(\beta_1(\hbar\omega-E_g))\times \times\exp((\beta_1-\beta_2)(\varepsilon_C-\varepsilon_0))\times[\exp((\beta_2-\beta_1)\hbar\omega)-1] \quad .(19)$$

Обнаружено, что данные, полученные по формуле (19) для экспоненциального поглощения, соответствуют экспериментальным, тогда $\beta_1$ = 24.2 эВ$^{-1}$ и $\beta_2$ = 31.7 эВ$^{-1}$ (рис. 2, кривая b).

Поскольку $\varepsilon_{D1}$ и $\varepsilon_{D2}$ являются точками пересечения экспоненциальных хвостов разрешенных зон и распределения электронных состояний на дефектах, мы вычисляем их по следующим формулам:

$$N(\varepsilon_C)\exp\left(\beta_2\left(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_C\right)\right)=2g\left(\varepsilon_D\right)\exp(b(\varepsilon_{D2}-\varepsilon_D)). \quad (20)$$

$$N(\varepsilon_V)\exp\left(-\beta_1\left(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V\right)\right)=2g\left(\varepsilon_D\right)\exp(-b(\varepsilon_{D1}-\varepsilon_D)). \quad (21)$$

Отсюда получаем следующие выражения:

$$\varepsilon_{D1}=(\ln(\frac{N(\varepsilon_V)}{2g(\varepsilon_D)})+b\varepsilon_D+\beta_1\varepsilon_V)/(b+\beta_1). \quad (22)$$

$$\varepsilon_{D2}=(\ln(\frac{2g(\varepsilon_D)}{N(\varepsilon_C)})+b\varepsilon_D+\beta_2\varepsilon_C)/(b+\beta_2). \quad (23)$$

Расчеты по формулам (20) и (21) показали, что при изменении значения $b$ в интервале (12–35) эВ$^{-1}$ $\varepsilon_{D1}$ и $\varepsilon_{D2}$ меняются в пределах $\Delta\varepsilon\approx$0.1 эВ. Расчеты парциальных спектров коэффициента поглощения на дефектах показали, что эти изменения $\varepsilon_{D1}$ и $\varepsilon_{D2}$ не оказывают существенного влияния на вид спектров дефектного поглощения.

Формулы (9), (17), (15) и (10), (11), (16) рассчитаны для условий $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$ и $\varepsilon_C-\varepsilon_{D2}>\hbar\omega$.

Поскольку вид этих формул близок к друг другу, можно считать, что вычисленные по этим формулам парциальные спектры дефектного поглощения почти не различаются.

Из приведенных выше формул видно, что при увеличении или уменьшении значений $g(\varepsilon_D)$ эти спектры параллельно перемещаются соответственно вверх или вниз. Учитывая это, вычислим парциальные спектры дефектного поглощения только для дефекта $\varepsilon_D+\varepsilon_V-\approx$1.28 эВ и $g(\varepsilon_{D+})$ =3×1015 эВ$^{-1}$ см$^{-3}$ для оптических переходов электронов из валентной зоны на дефект. Расчеты получены по формулам (10) и (11) для $n_1$=1, $n_1$=0. Приближенные результаты расчетов, полученные при $n_1$=1/2, показали, что эти спектры совершенно не отличаются друг от друга (рис. 3).

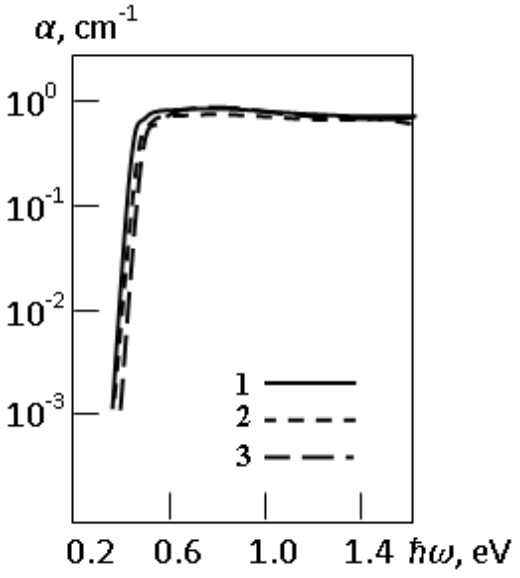



**Рисунок 3.** Парциальные спектры оптических переходов электронов между разрешенными зонами и дефектами: 1 – $n_1$=1, 2 – $n_1$=1/2, 3 – $n_1$ =0. Расчеты выполнены для $D^-$.

Следует отметить, что согласно экспериментальным результатам спектры дефектного поглощения α-Si:H лежат в области энергий 1.4 эВ<Δε, поэтому при расчетах этих спектров принимали $N_{D+}\approx g(\varepsilon_{D+})$.

Результаты расчетов, полученные по формулам (7) и (9) для различных значений b при $\varepsilon_D{}^+-\varepsilon_V-\approx$1,28 эВ и $g(\varepsilon_{D+})$=3×10$^{15}$ эВ$^{-1}$см$^{-3}$, представлены на рис. 4.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

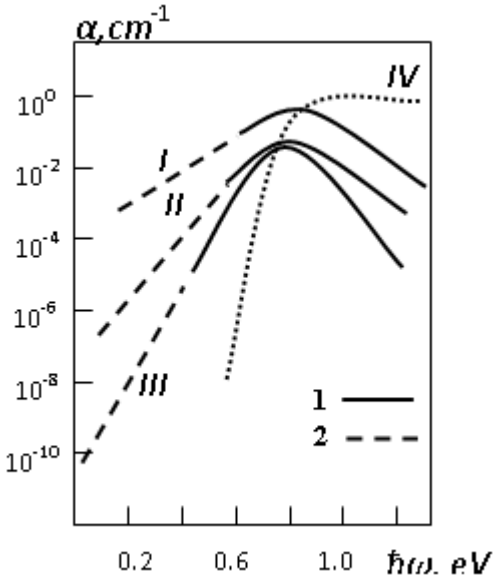



**Рисунок 4.** Парциальные спектры оптических переходов электрона от хвоста валентной зоны на $D^+$ дефект при: 1 – $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V>\hbar\omega$, 2 – $\varepsilon_{D1}-\varepsilon_V<\hbar\omega$; I – b=12 эВ$^{-1}$, II – b=24 эВ$^{-1}$, III – b=32 эВ$^{-1}$, IV – парциальный спектр оптических переходов электрона от валентной зоны на $D^+$ дефект.

На рис. 4 для сравнения представлен также спектр оптических переходов электронов из валентной зоны на дефект, рассчитанный по формуле (10). Видно, что парциальные спектры, определяемые оптическими переходами электронов между дефектами, хвостами разрешенных зон и значения b практически не влияют на величину спектра поглощения на дефектах. Известно, что экспериментальные спектры дефектного поглощения определяются суммой парциальных спектров поглощения, соответствующих всем оптическим переходам электронов. Следовательно, для каждого дефекта ($\varepsilon_D{}^0-\varepsilon_V-\approx0.78$ эВ, $\varepsilon_D-\varepsilon_V\approx0.5$ эВ, $\varepsilon_D{}^+-\varepsilon_V\approx1.28$ эВ и $N_D{}^0=4.5\times10^{15}$ см$^{-3}$, $N_D{}^-=3\times10^{15}$ см$^{-3}$, $N_D{}^+=3\times10^{15}$ см$^{-3}$) рассчитанные по формулам (7), (13) (9), (17) и (10), (15) и (11), (16) суммы парциальных спектров поглощения представлены на рис. 5.

Из рис. 2 видно, что значения спектров дефектного поглощения образца монотонно уменьшаются по мере уменьшения энергии поглощенных фотонов. Такое уменьшение можно наблюдать только в спектрах оптических переходов электронов с участием дефекта $\varepsilon_D{}^0-\varepsilon_V-\approx0.78$ эВ (рис. 5).

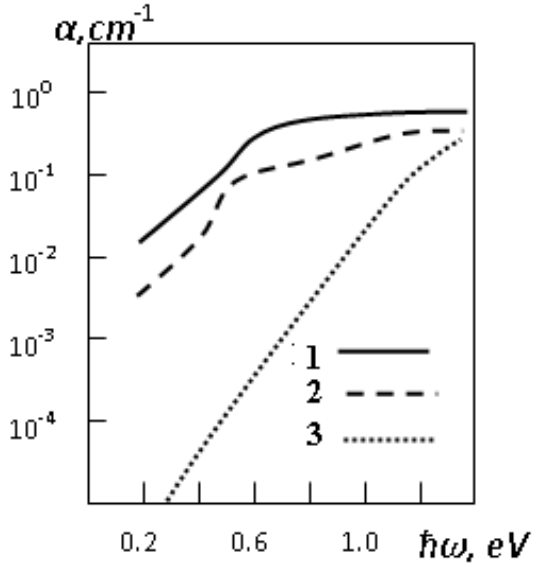



**Рисунок 5.** Суммарные значения парциальных спектров коэффициента дефектного поглощения, полученные по формулам (7), (9), (11), (13), (16), (17). Для $D^+$ (1), $D^-$ (2) и $D^0$ (3), формирующих оптические переходы между дефектными состояниями и разрешенными зонами и их хвостами. Расчеты проводили для $b$=12 эВ$^{-1}$.

Экспериментальные результаты, представленные на рис. 2, показывают, что $D^0$ дефект играет основную роль в определении спектра дефектного поглощения образца α-Si:H (с-линия, пунктирно-точечная кривая).

## III. Заключение

Таким образом, в настоящей работе проведено теоретическое исследование спектра дефектного поглощения гидрогенизированного аморфного кремния. Обнаружено, что парциаль-ные спектры, определяемые оптическими переходами электронов между разрешенными зонами и дефектами, играют ключевую роль в определении спектра дефектного поглощения. Также обнаружено, что спектр дефектного поглощения не зависит от значения степени при степенном распределении плотности электронных состояний в разрешенных зонах.

### Метаданные

**Defects characteristic for hydrogenated amorphous semiconductors and defective absorption spectra**

**B.T. Abdulazizov[1], R.G. Ikramov[2], M.A. Nuriddinova[2], B.K. Sultanov[2], O.T. Kholmirzaev[2]**

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.

[1]Namangan State University, Uychi str. 316, 716019, Namangan, Uzbekistan
[2]Namangan Institute of Engineering and Technology, Kasansay str. 7, 160115, Namangan, Uzbekistan

In the present work, the absorption spectra of all defects characteristic of hydrogenated amorphous silicon are theoretically studied. It has been found that the main role in determining the defect absorption spectrum plays the partial spectra determined by optical transitions of electrons between allowed bands and defects. It is shown that with a power-law distribution of the density of electronic states in allowed bands, the spectra of optical transitions between them and defects do not depend on the value of this power.

**Keywords:** amorphous semiconductors, optical transitions of electrons with the participation of defects, spectra of defective absorption, partial spectra of optical electronic transitions with the participation of defects.

## Литература (References)

[1] V. I. Fistul. Vvdeniye v fiziku poluprovodnikov (Moskow, Vysshaya Shkola, 1984).
[2] M.S. Ablova, G.S. Kulikov, S.K. Persheev. FTP, **36**, No.8, 1001-1003 (2002).
[3] M. Gunes and Ch.R. Wronski. AIP **81**, No.8, 3526-3536 (1997).
[4] E.A. Davis, N.F. Mott. Electronic Processes in Non Crystalline Materials (Clarendon Press, Oxford, 1979).
[5] R.G. Ikramov, A.A. Mamaxanov, M.A. Nuriddinova, R.M. Jalolov, Kh.M. Muminov, and B.Q. Sultonov. Journal of Applied and Engineering **25**, No.5, 767-772 (2017).
[6] G.D. Cody. Hydrogenated Amorphous Silicon. Optical Properties. Semicoductors and Semimetals **21**, (1984).
[7] S.K. O'Leary. Solid State Commun. **109**, 589-594 (1999).
[8] S. Zaynobidinov, R.G. Ikramov, R.M. Jalalov. Jurnal Prikladnoy Spektroskopii **78**, No.2, 243-247 (2011).
[9] R.G. Ikramov. Estestvennie i texnicheskie nauki **6**, 58-63 (2007).
[10] F. Orapunt, S.K. O' Leary. Mater. Electron. **20**, 1033-1038 (2009).
[11] S. Zaynobidinov, R.G. Ikramov, R.M. Jalalov, M.A. Nuriddinova. Optika i Spetktrosrohiya. **110**, No.5, 813 (2011).

## Гидрогенизацияланган аморф яримўтказгичларга хос нуқсонлар ва нуқсонларда ютилиш спектрлари

**Б.Т. Абдулазизов[1], Р.Г. Икрамов[2], М.А. Нуриддинова[2], Б.К. Султанов[2], О.Т. Холмирзаев[2]**

[1]Наманган давлат университети, Уйчи кўчаси, 316, 716019, Наманган, Ўзбекистон
[2]Наманган муҳандислик-технология институти, Косонсой кўчаси 7, 160115, Наманган, Ўзбекистон

Ушбу ишда гидрогенизацияланган аморф кремнийга хос бўлган барча парциал нуқсонларда ютилиш спектрлари назарий тадқиқ қилинди. Бу намунани нуқсонларда ютилиш спектрларини аниқлашда асосий ролни электронларни рухсат этилган зоналар ва нуқсонлар орасидаги оптик ўтишлари билан аниқланадиган парциал спектрлар ўйнаши аниқланди. Рухсат этилган зоналардаги электрон ҳолатлари зичлиги тақсимоти даражали бўлганда улар ва нуқсонлар орасидаги оптик ўтиш спектрлари бу даражани қийматига деярли боғлиқ бўлмаслиги кўрсатилди.

**Калит сўзлар:** Аморф яримўтказгичлар, электронларни нуқсонлар иштирокидаги оптк ўтишлари, нуқсонларда ютилиш спектри, нуқсонлар иштирокидаги оптик ўтишларни парциал спектрлари.

©Академия наук Республики Узбекистан, 2023 г.